Résolution des équations de transport dans une décharge luminescente d'argon et l'étude de l'influence de différents paramètres

Djilali Benyoucef (*), Bachir Belmadani (*) et Abderrahmane Settaouti (+)

(*) Enseignant chercheur, département d' Electrotechnique,

Université de Hassiba Benbouali, Chlef.

(+) Enseignant chercheur, département d' Electrotechnique,

U.S.T.Oran.

E-mail : ben_plasma@yahoo.fr

Résumé : Plusieurs travaux, sont réalisé, dans le cadre de la modélisation des décharges luminescentes continues, en particulier, le modèle fluide, cinétique et le modèle hybride qui est la combinaison entre la simulation de Monte Carlo et le modèle fluide. Dans ce travail, on résoudre les deux moments de l'équation de Boltzmann couplés avec l'équation de Poisson, on présente aussi une étude paramétrique cela pour une décharge luminescente, dans un gaz électropositif (l'argon), à une pression de 0.3 à 1 torr, une distance iner-électrodes de 1 à 3.5 cm et les tensions de la décharges sont de quelques centaines de Volts, la teste de validité des résultats a été faite sur le model mathématique utilisé et sur les données de base

I. Introduction

Du fait de leurs grandes applications industrielles, les décharges luminescentes ont été beaucoup étudiées à la fois expérimentalement et théoriquement [1,2,3,4,5,6]. La bonne modélisation de ces décharges permet de comprendre leur comportement général, d'où le contrôle et l'optimisation des réacteurs à plasma dans les différents secteurs. Elles ont envahi des domaines d'importance vitale, tels que, la gravure, le dépôt de couches minces, l'analyse de pureté, les lampes à décharge basse pression ou encore les écrans à plasma fonctionnent à l'aide de décharges luminescentes. Notre objectif est résoudre les équations de transport dans ce type de décharge et d'étudie l'influence de différents paramètres sur la densité des particules chargées et la densité du courant électrique. Ainsi, l'influence du coefficient d'émission électronique secondaire car Un certain nombre de ces applications sont directement reliées au comportement des particules lourdes, ions et neutres, dans la décharge. Par exemple, la gravure, le dépôt de couches minces (PVD) ou encore l'analyse de pureté reposent sur le processus de pulvérisation de surfaces dû au bombardement des ions et des neutres de forte énergie.

II. Modèle physique

Le problème consiste à modéliser, pour l'état stationnaire, les distributions du champ électrique et des particules chargées de façon auto-cohérente dans le cas d'une décharge luminescente. En envisageant envisagé l'approche de l'équilibre au champ local, les électrons et les ions sont décrits par les équations de continuité et de transfert de la quantité de mouvement qui sont couplées à l'équation de Poisson. Le terme source qui apparaît dans les équations de continuité est dû à l'ionisation en volume (ionisation directe par impact électronique depuis le niveau fondamental). Dans cette approche le taux d'ionisation est supposé être une fonction de la valeur locale de E/p (rapport entre le champ électrique et la densité de neutres) ; cette approche est raisonnable pour les régimes de décharges très collisionnels. Pour être complet, le modèle a besoin de conditions aux limites; nous les spécifierons ultérieurement. Dans tous les cas, le modèle utilisé est unidimensionnel. Dans cette étude, nous avons pris une distance inter-électrodes de 1 à 3.5 cm et une pression d'argon de 0.3 à 1 Torr. Le rapport de la densité de courant sur la pression au carré (J/p2) est de l'ordre du mA/cm2/Torr2. Les tensions dans la décharge sont de l'ordre de quelques centaines de Volts.

III. Modèle mathématique

Le transport des particules devrait être basé sur la résolution de l'équation du Boltzmann. La résolution de cette équation est extrêmement difficile d'un point de vue mathématique et numérique. De cette raison, on remplace l'équation du Boltzmann par un système d'équations constitué des deux premiers moment : l'équation de continuité et l'équation de transfert de la quantité de mouvement. Ce système fini d'équations n'est pas équivalent à l'équation de Boltzmann (il faudrait une infinité d'équation) et doit être fermé par des hypothèses convenables sur les moments d'ordre supérieur, telles que l'hypothèse de l'équilibre local. En ajoutant les hypothèses simplificatrices suivantes :

- La décharge est considérée entre deux plaques planes est parallèles, la distance entre elles est négligeable devant les dimensions de chaque plaque, de cette hypothèse la réduction du problème à une seule dimension est justifiée. Le gaz est faiblement ionisé. D'où, on considère seulement les collisions entre les particules chargées et les neutres.

- Les ions négatifs ne sont pas considérés car le gaz est électropositif.

- Le coefficient d'ionisation et la mobilité des ions sont considérés comme des fonctions du champ réduit seulement.
- Les coefficients de diffusion électroniques et ioniques aussi bien que la mobilité des électrons sont des fonctions de la pression seulement.

- Pour des raisons expérimental, et puisque notre modèle est unidimensionnel, on calcule la densité de courant et non

pas le courant total. Pour résoudre l'équation du circuit, on suppose que la surface de la cathode est de 1 cm^2.

- L'émission d'électrons secondaires à la cathode résulte de l'impact des ions, dans le cas d'argon est égal à 0.06 pour une cathode de cuivre [7] quel que soit le champ électrique.

Le système d'équation devient comme suit :

Les équations de continuité des électrons et des ions positifs sont :

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \frac{\partial \phi_e}{\partial x} = \alpha.\phi_e \tag{1}$$

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \frac{\partial \phi_i}{\partial x} = \alpha.\phi_e \tag{2}$$

où n_e , n_i,,Φ_e et Φ_i sont respectivement ; la densité électronique, la densité ionique, le flux électronique et le flux inique, α représente le coefficient d'ionisation par impact électronique.

Les équations de transfert de la quantité de mouvement des électrons et des ions positifs sont :

$$\phi_e = \mu_e.E.n_e -_e . \frac{\partial n_e}{\partial x} \tag{3}$$

$$\phi_i = \mu_i.E.n_i - D_i.\frac{\partial n_i}{\partial x} \tag{4}$$

où μ_e ,μ_i,,D_e et D_i sont respectivement ; la mobilité électronique, la mobilité ionique, le coefficient de diffusion électronique et le et le coefficient de diffusion inique, E représente le champ électrique.

Le champ électrique est relié à la charge d'espace dans l'espace inter-électrode à partir de l'équation de Poisson.

$$\frac{\partial E}{\partial x} = \frac{|e|}{\varepsilon_0}(n_i - n_e) \tag{5}$$

où ε_0 et e sont respectivement ; la permittivité du vide ε_0 =8.85×10^{-14} $CV^{-1}cm^{-1}$ et la charge de l'électron e =1.6× 10^{-19} C. ce champ est relie avec le potentiel par la relation suivante :

$$E = -\frac{\partial V}{\partial x} \tag{6}$$

Pour résoudre ces équations, il faux choisir des conditions aux limites, le choix de ces derniers dans une modèle macroscopique est un problème important; il n'y a pas des solution exacte à ce problème, car seul un modèle microscopique peut parfaitement prendre en compte la présence des parois. Pour cela, on suppose que le flux des ionique sur les parois s'écrit :

$$\phi_i = a\, n_i \mu_i E + 0.25 n_i V_{th,i} \tag{7}$$

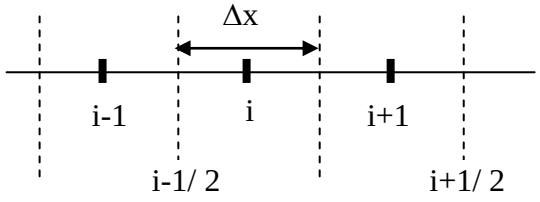
tel que $V_{th,i}$ représente la vitesse thermique des ions et le coefficient a est égal à 0 si la vitesse de dérive n'est pas dirigée vers la paroi et 1 dans le cas contraire[8]. Ce flux est très important dans la cathode est l'énergie des ions est supérieur à l'énergie d'activation du métal cathodique. Alors, on peut avoir des électrons secondaires émis le flux de ces derniers est donné par la relation suivante

$$\phi_{e,cat} = \gamma.\phi_{i,cath} \tag{8}$$

où $\Phi_{e,cath}$ et $\Phi_{i,cath}$ sont respectivement ; le flux électronique et le flux ionique juste à la cathode, γ représente le coefficient d'émission électronique secondaire. On considère aussi que la variation de la densité des ions au voisinage des électrodes est nulle et la variation de la densité des électrons au voisinage de l'anode est nulle. Concernant le potentiel il y a deux conditions aux limites, tension cathodique V = Vc et tension anodique V = 0. (Vc ; une tension négative). Les concentrations initiales sont considérées constantes de l'ordre de 10^7 particule/cm^3.

IV. Résolution numérique

Les équations (1) à (6) décrivant le transport des particules chargées et l'équation de Poisson forment un système d'équations non linéaires fortement couplées ; le traitement de ces équations représente donc un problème numérique difficile. Une des raisons de ces difficultés est liée à l'existence du plasma dont le champ électrique doit être calculé à partir de densité électronique et ionique très grandes et dans la différence est très faible et aussi, les gradients de concentration des particules chargées peuvent être très importants. Par exemple, une approximation aux différences standard de l'expression du flux entraînerait une instabilité numérique lorsque la différence de potentiel entre deux points voisins serait de l'ordre ou supérieur à l'énergie caractéristique D/μ. De cette raison, on choisi un schéma numérique appelé le schéma exponentiel [9], on suppose aussi que le flux de particules, la vitesse de dérive et le coefficient de diffusion sont constants entre deux points consécutifs. L'intégration de l'équation du flux donne :



$$\phi_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{\Delta x}\left(n_i D_i \exp\left(z_{i+\frac{1}{2}}\right) - n_{i+1} D_{i+1}\right)\frac{z_{i+\frac{1}{2}}}{\exp\left(z_{i+\frac{1}{2}}\right) - 1} \tag{9}$$

où $\Phi_{i+1/2}$ représente le flux de particules entre les points i et i+1 sur lesquels sont définis les densités, l'indice i+1/2 indique le point milieu, Δ x est la distance entre deux point successifs et $z_{i+1/2}$ est défini par la relation suivante :

$$z_{i+\frac{1}{2}} = -s.\frac{\mu_{i+\frac{1}{2}}}{D_{i+\frac{1}{2}}}(V_{i+1} - V_i) \tag{10}$$

où s est égal à +1 pour les ions positifs et à -1 pour les électrons.

L'avantage de ce schéma est qu'il donne une estimation numérique stable du flux de particules indépendamment des conditions de calcul. L'expression (10) valable pour des valeurs positives et négatives du paramètre z , si bien que ce schéma peut traiter des inversions du sens du champ électrique.

On reporte l'expression (10) dans l'équation de continuité on trouve :

$$\frac{n_i^{k+1}-n_i^k}{\Delta t}+\frac{\phi_{i+\frac{1}{2}}^{k+1}-\phi_{i-\frac{1}{2}}^{k+1}}{\Delta x}=\left(\alpha\phi_e\right)_i^k \qquad (11)$$

où Δt est le pas dans le temps, les indices k et k+1 correspondent aux instants t^k et $t^{k+1} = t^k + \Delta t$. le champ électrique, le potentiel, les coefficients de transport, et le terme source sont calculés à l'instant t^k , cependant les concentrations des particules sont pris à l'instant t^{k+1} dans l'évaluation des flux ; ce qui donne le système suivant :

$$n_i^k+\Delta t\left(\alpha\phi_e\right)^k=n_{i-1}^{k+1}T_{i-1}^k+n_{i-1}^{k+1}T_i^k+n_{i-1}^{k+1}T_{i+1}^k \qquad (12)$$

où :

$$T_{i-1}^k=-\frac{\Delta t}{\Delta x^2}D_{i-1}\frac{z_{i-\frac{1}{2}}\exp\left(z_{i-\frac{1}{2}}\right)}{\exp\left(z_{i-\frac{1}{2}}\right)-1}$$

$$T_{i-1}^k=1+\frac{\Delta t}{\Delta x^2}D_1\left(\frac{z_{i+\frac{1}{2}}\exp\left(z_{i+\frac{1}{2}}\right)}{\exp\left(z_{i+\frac{1}{2}}\right)-1}+\frac{z_{i-\frac{1}{2}}}{\exp\left(z_{i+\frac{1}{2}}\right)-1}\right)$$

$$T_{i+1}^k=-\frac{\Delta t}{\Delta x^2}D_{i+1}\frac{z_{i-\frac{1}{2}}\exp\left(z_{i+\frac{1}{2}}\right)}{\exp\left(z_{i+\frac{1}{2}}\right)-1}$$

Finalement, on obtient un système à matrice tridiagonale, on peut le résoudre directement (élimination du Gauss).

V. Résultats

A. Paramètres :

Le coefficient d'ionisation par impact électronique à partir du l'état fondamental de l'atome de l'argon.

$$\alpha=Ae^{-B\sqrt{\frac{p}{|E|}}} \qquad (13)$$

A=29.22 $cm^{-1}torr^{-1}$, B=26.64$V^{1/2}cm^{-1/2}$ $torr^{-1/2}$[10], p représente la pression du gaz.

Les coefficients de diffusion pour les électrons et les ions de l'argon (Ar^+) sont indépendants du champ électrique.

$D_e = 5\times10^5$ cm^2s^{-1}(torr/p), $D_i = 1\times10^2$ cm^2s^{-1}(torr/p).

La mobilité des électrons est considérée aussi indépendante au champ, $\mu_e = 2\times10^5$ cm^2V^{-1} s^{-1}(torr/p).

La mobilité des ions positifs est une fonction du champ et la pression du gaz.

$$\mu_\circ=\frac{\mu_1}{1+\mu_2\sqrt{|E|}} \qquad (14)$$

où μ_1 μ_2 sont listé dans le tableau suivant [10] pour trois valeurs de pression.

P (torr)	μ_1 (cm^2 $V^{-1}s^{-1}$)	μ_2 ($cm^{1/2}$ $V^{-1/2}$)
0.3	42 940	2.81
0.5	18 190	1.52
1.0	5 740	0.66

B. Teste de validité

Pour le teste de validité on fait deux testes, une sur les données de base utilisées et l'autre sur le modèle.

B.1 Teste de validité des données

Pour faire le teste de validité des données de base, on fait la comparaison entre nos résultats, et les résultats obtenus par PEDOUSSAT, [7] pour le même modèle, mais il a utilisé les données de base calculées par BOLZIG, cela pour les mêmes conditions de fonctionnement.

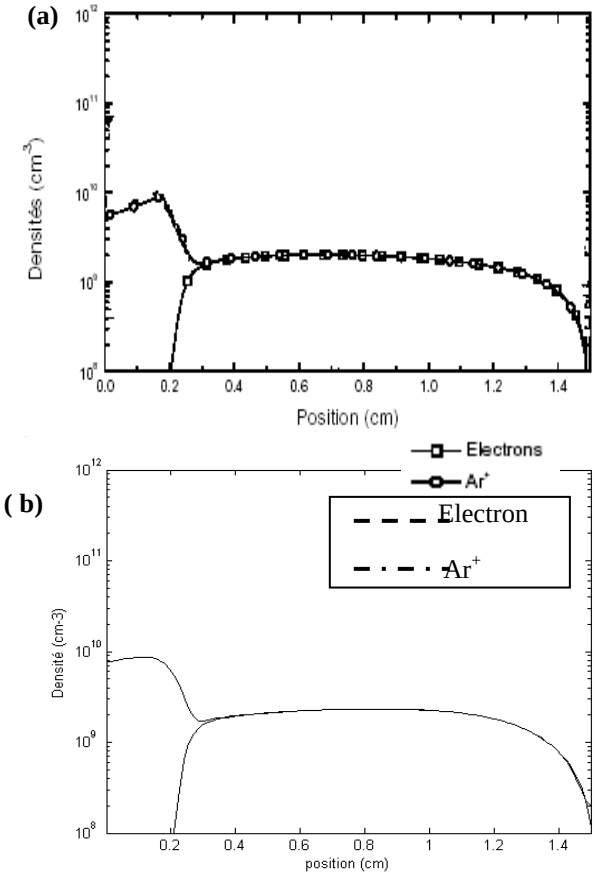
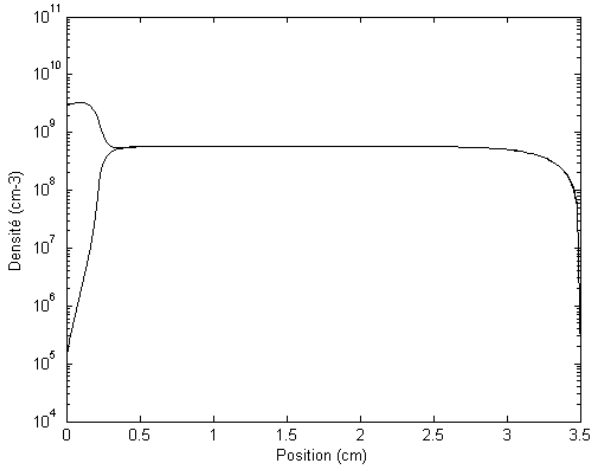


FIG. 1. (a) résultats de Pedoussat, (b) Nos résultats , pour une tension de décharge Vc= -400 v, p = 1 torr, un espace inter-électrodes de 1.5 cm et coefficient d'émission électronique secondaire $\gamma = 0.06$.

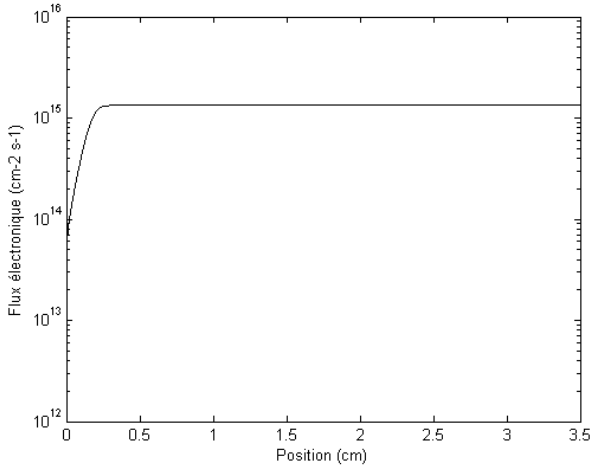
B.2 Teste de validité du modèle

Vu de la complicité du schéma utilisé dans ce modèle, nous avons comparé nos résultas avec ceux de Schmitt et Kohler [10] qui ont basé sur les même données de base mais par un modèle différent (Modèle qui résoudre les équations du transport en régime permanent $\partial/\partial t$ =0 et aussi le circuit est alimenté en courant).

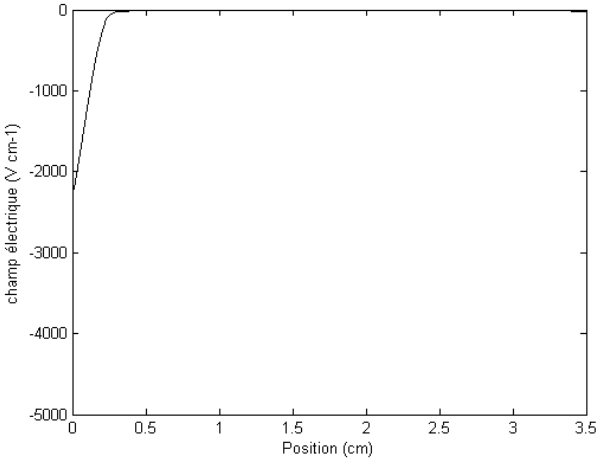
a)



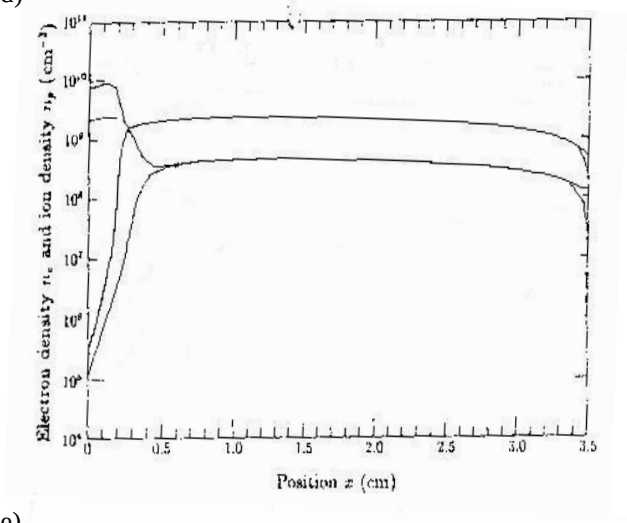
b)



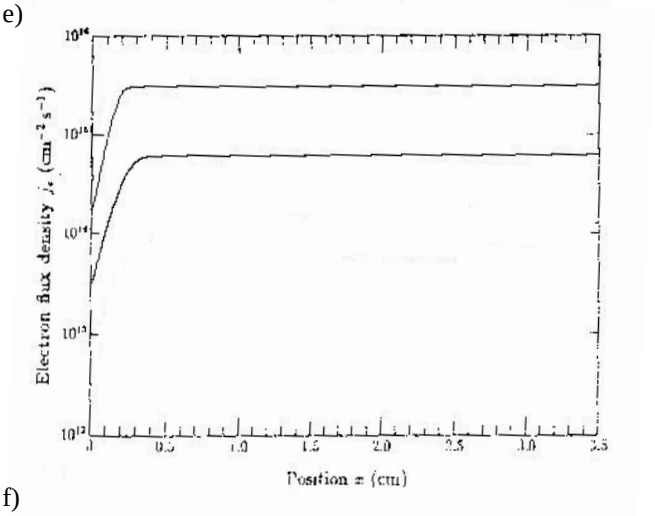
c)



d)



e)



f)

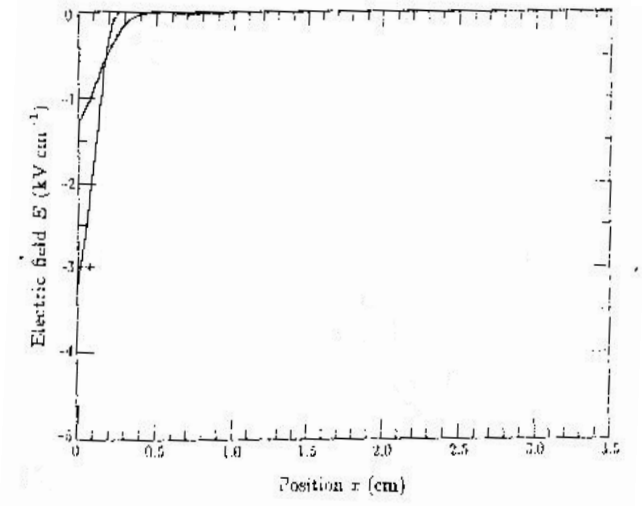


FIG. 2. (a), (b), (c) Nos résultats obtenus pour une tension de décharge Vc=-300 v (-2.1566×10^{-4} A cm^{-2}) , p = 1 torr, un espace inter-électrodes de 3.5 cm et coefficient d'émission électronique secondaire γ = 0.05. (d), (e), (f) résultats de Schmitt et Kohler [10] calculés par un Modèle en régime stationnaire pour un espace inter_électrode de 3.5 cm, un coéfficient d'émission électronique secondaire γ = 0.05 , une pression p= 1 torr et deux différents courants (-1×10^{-4} A cm^{-2} et -5×10^{-4} A cm^{-2}).

B.3 Etude paramétrique

Les premiers résultats sont obtenus pour un pression de 1 torr, un espace inter_électrode de 1.5 cm et un coefficient d'émission électronique secondaire de 0.06 (le coefficient d'émission électronique secondaire du cuivre) et une tension de décharge -200 V, -300V et -400V.

L'épaisseur de gaine décroît quand la tension augmente, et par conséquent le maximum de la

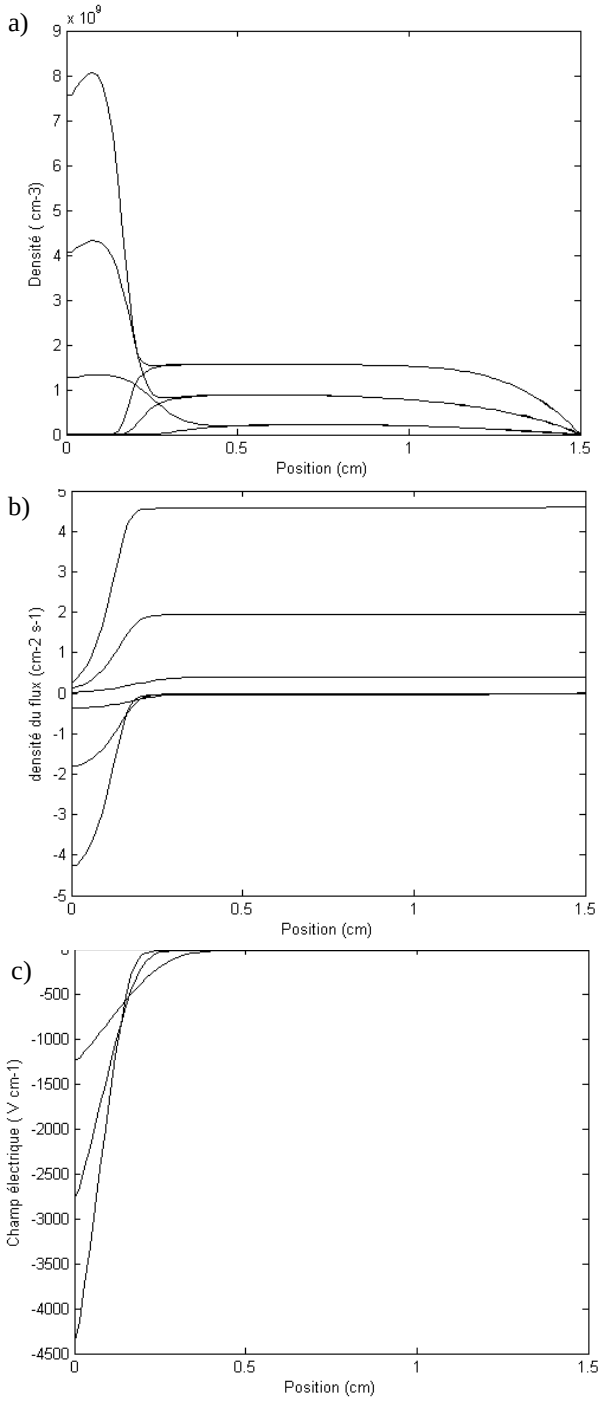


FIG. 3. (a) les densités des espèces chargées (électrons et les ions Ar^+), (b) les densités des flux électroniques et ioniques et (c) les champs électriques obtenus pour une pression p = 1 torr, un espace inter-électrodes de 1.5 cm et coefficient d'émission électronique secondaire $\gamma = 0.06$ avec différentes valeurs de tension de décharges (-200 V, -300V et -400 V)

L'épaisseur de gaine décroît quand la tension augmente, et par conséquent le maximum de la densité des espèces se décale vers la cathode, ce dernier augmente lorsque la tension augmente et par suite la valeur maximale du champ électrique aux voisinage de la cathode, d'où augmentations des flux électroniques et ioniques.

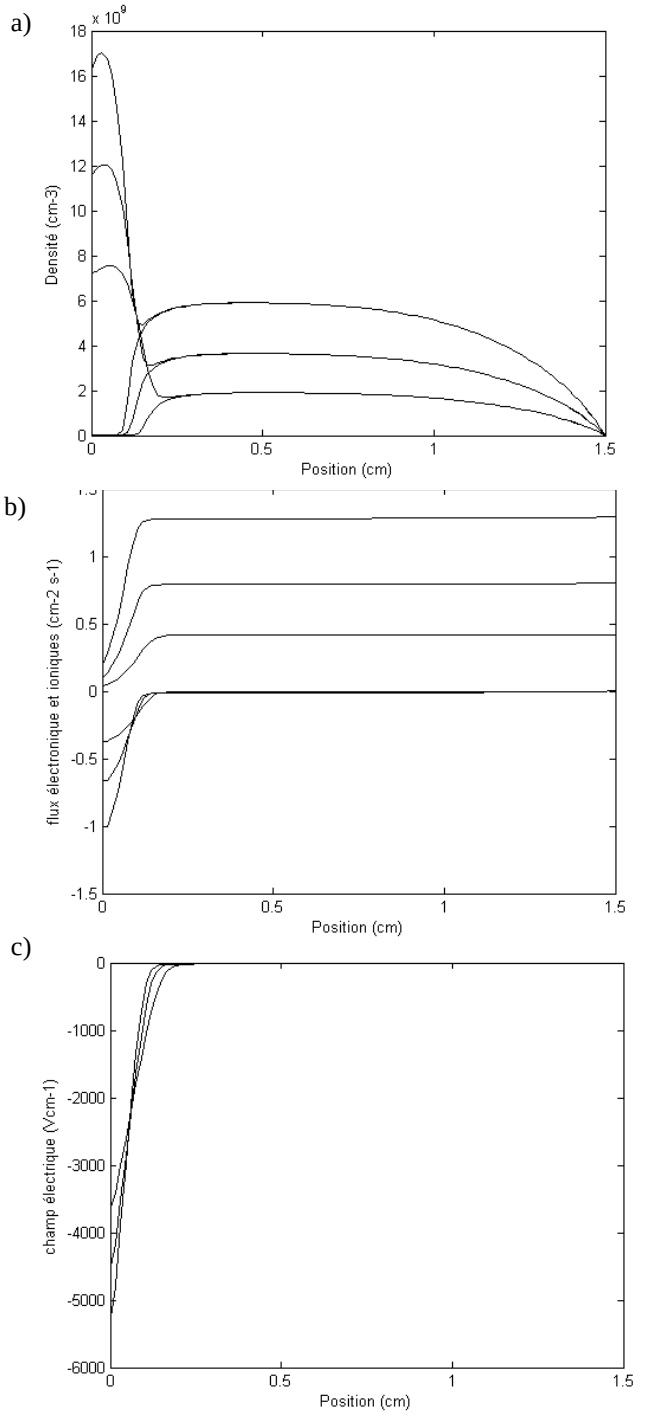


FIG. 4. (a) les densités des espèces chargées, (b) les densités des flux électroniques et ioniques et (c) les champs électriques obtenus pour une pression p = 1 torr, un espace inter-électrodes de 1.5 cm et une tension de décharge -300 V pour différentes valeurs du coefficient d'émission électronique secondaire $\gamma = 0.1$, 0.15 et 0.20.

Des auteurs ont remarqué que le coefficient d'émission secondaire "effectif" (défini comme le rapport du courant électronique et le courant ionique à la cathode dans une décharge électrique) déduit des tensions de claquage dépendait de la valeur du champ électrique à la cathode [11, 12, 13], si on suppose que le seul processus d'ionisation en volume est l'ionisation par impact électronique. Alors l'augmentation de γ résulte la croissance de la densité des espèces chargées et les flux et des gaines plus en plus étroites.

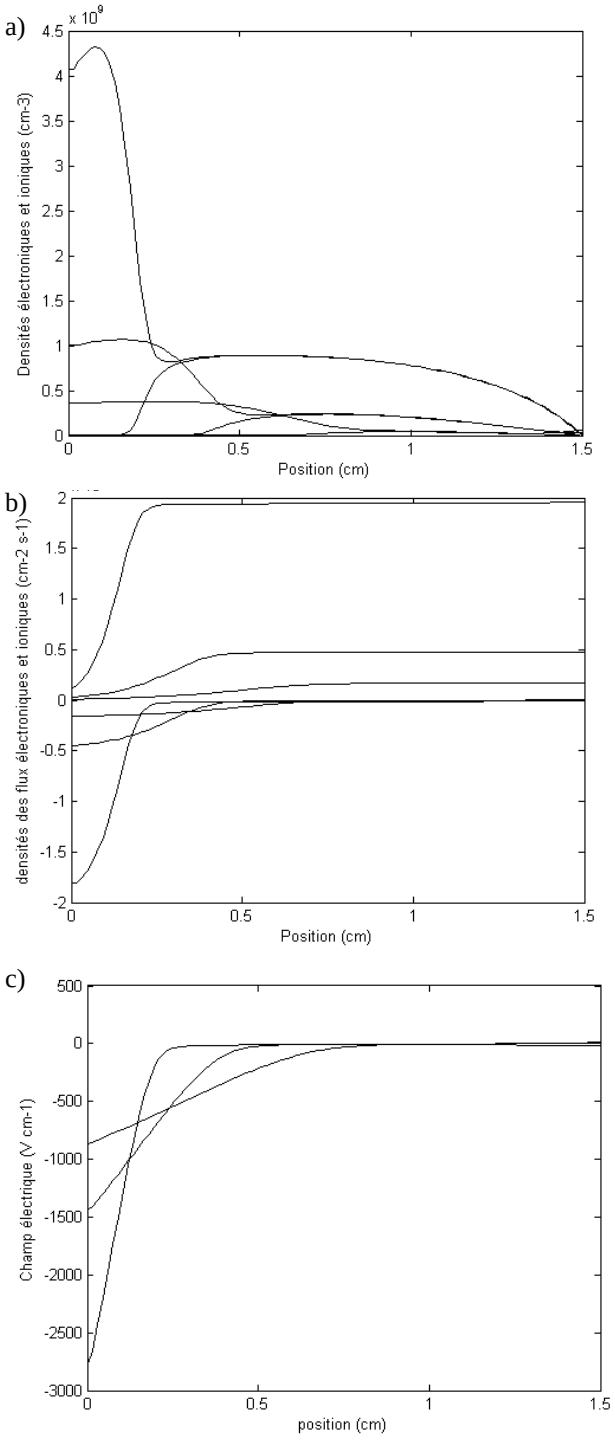


FIG. 5. (a) les densités des espèces chargées, (b) les densités des flux électroniques et ioniques et (c) les champs électriques obtenus pour une un espace inter-électrodes de 1.5 cm et une tension de décharge -300 V pour différentes, un coefficient d'émission électronique secondaire γ = 0.06 et pour différentes valeurs de pression 0.3 torr, 0.5 torr et 1 torr.

La variation du pression a une grande influence sur les caractéristiques électriques de la décharges, la diminution de cette dernière a la moitie permet de diminuer la densité des espaces chargées a la moitie et de doubler la largeur de la gaine cathodique.

VI. Conclusion

Dans cet article, nous avons essayé d'appliquer un modèle fluide, en basant sur l'hypothèse de l'équilibre au champ local. Nous avons essayé de résoudre ces équations de transport par le schéma exponentiel avec des conditions aux limites, en introduisant le coefficient d'émission électronique secondaire.

Ce modèle présenté, peut être très utile à l'utilisateur de ce type de décharge, dans la mesure où il peut être utilisé pour prédire l'évolution et le comportement de la décharge, lorsque certains paramètres macroscopiques sont modifiés.

Références:

[1] M. Meyyappan and J.P.L Kreskovsky ' Glow discharge simulation through solutions to thr Boltzmann transport equation', J.Appl. Phys, 68(4), p1504 (1990).
[2] A. Bogarets and R. Gijbels, ' Hybrid Monte Carlo-fluid model of a direct current glow discharge', J.Appl. Phys. 78(4) , p2233 (1995).
[3] A. Bogaerts et R. Gijbels, "Role of sputtered Cu atoms and ions in a direct current glow discharge : combined fluid and Monte Carlo model", J. Appl. Phys. 79 (3), p1279 (1996).
[4] A. Bogarts and R. Gijbels, 'Computer Simulation of an Analytical Direct Current Glow Discharge in Argon: Influence of the Cell Dimensions on the Plasma Quantities, J. Analytical Atomic Spectrometry, Vol. 12 p751(1997) .
[5] Annemie Bogaerts · Renaat Gijbels, 'Three-dimensional modeling of a direct current glow discharge in argon: is it better than one-dimensional modeling?', J. Anal chem, p331 (1997).
[6] Ivan Revel, 'Simulation Monte Carlo des Particules lourdes dans une décharges luminescente basse pression', Thèse de doctorat de l'université de Toulouse, France (1999).
[7] Cécile PEDOUSSAT,'Modélisation auto-Coherente de la pulvérisation cathodique dans une décharge luminescente basse pression', Thèse de doctorat de l'université de Toulouse, France (1999).
[8] C. Punset ,' Modélisation bidimensionnelle fluide d'un écran plasma', Thèse de doctorat de l'université de Toulouse, France (1998).
[9] D.L. Scharfetter and H. k. Gummel. IEEE Trans. Electron Divices ED-16, 64 (1969).
[10] W. Schmitt and W. Kohler ,' A one dimensional model of dc glow discharges', J. Appl. Phys. 71 (12), p5783 (1992).
[11] Y.P. Raizer, Gas discharge physics (Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg and New York, (1991).
[12] G. Auday, Ph. Guillot, J. Galy et H. Brunet, "Experimental study of effective secondary emission coefficient for rare gases and copper electrodes", J. Appl. Phys. 83 (11), p 5917 (1998).
[13] A.V. Phelps et Z.Lj. Petrovic, "Cold-cathode discharges and breakdown in argon : surface and gas phase production of secondary electrons", Plasma Sources Sci. Technol. 8, R21-R44 (1999).